

Oscillateurs à deux degrés de liberté en mécanique classique et mécanique quantique.

Correcteurs : Michel Fruchart 1 et Étienne Thibierge 2

Leçon présentée le jeudi 23 janvier 2014

Le présent compte-rendu a pour but de résumer et compléter la discussion qui a suivi la présentation de la leçon en classe. Bien entendu, il est partiel et partial, et n'est qu'un point de vue qui n'engage que ses auteurs. Rappelons que c'est vous qui présenterez les leçons en fin d'année, et que c'est donc à vous de décider de ce que vous voulez en faire.

le couplage par effet tunnel est délicat à traiter. Il faut bien prendre le temps de dégager les analogies et les différences des systèmes classiques et quantiques.

1997 : La notion de mode propre doit être définie avec précision.

Extraits des rapports du jury

Rappelons que le préambule du rapport de l'épreuve de leçon s'attache à présenter en détails les attentes et exigences du jury. Vous êtes plus qu'encouragés à le lire.

Jusqu'en 2013, la leçon s'intitulait « Oscillateurs à deux degrés de liberté en mécanique classique : modes propres. Systèmes à deux niveaux d'énergie en physique quantique. Analogies et différences. » Il faut interpréter ce changement de titre comme une volonté d'élargir le spectre de la leçon plutôt que d'un renouvellement complet. Tous les éléments de l'intitulé précédent restent complètement dans le sujet. En particulier, présenter deux parties complètement disjointes semble être une très mauvaise idée : si c'était ce que souhaitait le jury, il aurait proposé deux leçons différentes.

2009, 2010 : Le phénomène de battement (comme son analogue quantique) est au coeur de la leçon.

2005 : La notion de mode propre doit être parfaitement maîtrisée.

2002 : Trop souvent les leçons privilégient la partie classique par rapport à la partie quantique. Différences et analogies sont rarement mises en lumière.

2000 : Dans la partie relevant de la mécanique classique, il n'est pas utile d'envisager le cas le plus général, l'important étant de dégager les effets physiques avec un minimum de calculs. Les aspects énergétiques méritent d'être considérés. Il faut réserver un temps suffisant pour traiter le point « analogie et différences ». Bien que couramment utilisé comme exemple de système quantique à deux niveaux, l'inversion de l'ammoniac est un exemple délicat, car le terme de couplage y est difficile à interpréter physiquement. On peut trouver d'autres systèmes à deux niveaux, plus simples à présenter

1999 : Le choix du système quantique à traiter doit être bien réfléchi. Les candidats doivent être conscients que

Commentaires généraux

La leçon qui a été présentée demande d'être retravaillée, tant sur la forme que sur le fond. Rappelons que « la leçon est une épreuve permettant au jury d'évaluer la capacité du candidat à enseigner, c'est-à-dire à transmettre un message clair et cohérent qui s'appuie sur des connaissances maîtrisées » (rapport 2012).

Il n'est pas envisageable de n'écrire en tout et pour tout que deux mots au tableau dans le corps de la leçon. Les définitions importantes, les hypothèses, les approximations doivent systématiquement être écrites en toutes lettres, ainsi que les arguments importants pour le déroulement des calculs. Par ailleurs les notations importantes pour une mise en équation doivent être définies par écrit, idéalement à l'aide d'un schéma : autant il est superflu d'écrire systématiquement que ω est une pulsation, auant on ne vous pardonnera pas de ne pas définir des angles avec un schéma. Lorsqu'une expérience est réalisée au cours de la leçon, elle **doit** être accompagnée d'un schéma, au tableau ou plutôt sur transparent : faire un dessin propre au tableau n'est pas toujours simple, j'en sais quelque chose:) Ce schéma est alors l'occasion d'introduire toutes les notations utiles.

Une leçon d'agrégation est une leçon de *physique*, pas une leçon de *calculs*. Ainsi, résoudre une équation pour la résoudre n'a pas d'intérêt. Il faut commenter physiquement tous les résultats à base de « on remarque que telle grandeur diminue quand telle autre augmente, c'est cohérent parce que ... » ou « telle grandeur ne dépend pas de telle autre, ça se comprend bien en remarquant que ... ». Rappelons que le jury « recommande au candidat de motiver la nécessité de faire le calcul et d'en présenter l'objectif avant de le mener ». Par ailleurs, il va de soi que les erreurs de calcul à répétition ne sont pas appréciées du jury.

Enfin, l'épreuve dure cinquante minutes, et il faut faire bon usage de ce temps : il n'est pas raisonnable de s'arrêter au bout de 43 minutes sans pouvoir rien ajouter.

 $^{1. \ {\}tt michel.fruchart@ens-lyon.fr}$

 $^{2. \ \}mathtt{etienne.thibierge@ens-lyon.fr}, \ \mathtt{http://perso.ens-lyon.fr/etienne.thibierge@ens-lyon.fr}$

Retour sur la leçon présentée

Introduction

La définition donnée d'un oscillateur à deux degrés de liberté est d'emblée fausse. Décrire le mouvement d'un oscillateur harmonique simple nécessite également deux paramètres indépendants, l'amplitude et la phase. Ici il vaudrait mieux parler de deux paramètres géométriques, variant dans le temps et indépendants. Pour mathématiser, on peut parler de deux fonctions du temps indépendantes.

Par souci de rigueur, penser à préciser dès l'introduction que la leçon se restreint au cas de deux oscillateurs identiques.

I - Pendules couplés par un fil de torsion

1/ Position du problème

Un schéma est ici plus qu'indispensable!

2/ Mise en équation

Penser toujours à bien définir au tableau le système auquel vous appliquez les équations de la dynamique, et le référentiel dans lequel vous le faites. Rappelons que le moment cinétique s'exprime par rapport à un point ou à un axe, qu'il faut préciser systématiquement.

L'intérêt physique des modes propres doit être mis plus clairement en évidence. Attention à donner une définition exacte: un mode propre est une solution harmonique des équations du mouvement, dans laquelle il y a une relation spécifique entre l'amplitude et la phase du mouvement des deux oscillateurs. D'un point de vue mathématique, il ne s'agit certes que d'un changement de base, mais le découplage aussi bien dynamique qu'énergétique rend leur utilisation physique naturelle. Le nombre de modes propres est égal au nombre d'oscillateurs couplés : les deux pendules pesants présentent deux modes propres, les quatre masses couplées par des ressorts en ont quatre, et une corde de Melde, constituée d'un continuum d'oscillateurs, une infinité. On parle aussi de modes normaux, ce qui souligne leur indépendance (ils sont orthogonaux au sens d'un certain produit scalaire : c'est ce qui permet leur découplage).

Il est incontournable de commenter la dépendance des deux fréquences propres en la constante de couplage. Tant que les deux oscillateurs sont identiques, le mode symétrique a toujours pour fréquence propre celle des oscillateurs libres, qui ne fait donc pas intervenir la constante de couplage. Au contraire, la pulsation propre du mode antisymétrique, qui est toujours supérieure à celle du mode symétrique, fait intervenir ladite constante de couplage. Ce résultat peut se comprendre en termes de décomposition du problème à deux corps en mouvement d'ensemble et mouvement relatif. Le mode symétrique décrit la dynamique du centre de masse, et ne fait intervenir que les efforts extérieurs au système, donc pas le couplage qui est un effort intérieur. Au contraire, le mode anti-symétrique

décrit le mouvement relatif, et fait donc intervenir à la fois les efforts intérieurs et extérieurs au système.

3/ Modes propres et battements

L'idée de présenter cette partie à la fois théoriquement par des calculs et de l'illustrer expérimentalement est bonne, et est à garder.

Il faut mieux mettre en avant la spécificité des modes propres par rapports aux oscillations quelconques : ils se font sans battement, et leur spectre de Fourier ne contient qu'une seule fréquence.

Un point sur lequel il faut insister est que la contribution de chacun des modes propres aux oscillations ne dépend que des conditions initiales. Si un des modes propres n'est pas excité par les conditions initiales, alors il ne sera jamais excité par la suite. C'est une conséquence physique du découplage des modes propres. Au contraire, même si un des oscillateurs n'est pas excité par les conditions initiales, le couplage fait qu'il oscillera quand même au bout d'un certain temps.

Attention à la présentation des FFT. Dire « on voit deux fréquences » alors qu'il y a au moins cinq pics de grande taille n'est pas très honnête. Vous devez connaître le principe d'une FFT et les paramètres d'influence, voir le complément.

Deux oscillateurs couplés se mettent spontanément dans leur mode symétrique pour deux raisons. La première est que la dissipation est plus élevée dans le mode antisymétrique, puisqu'il excite le dispositif de couplage et ses imperfections. La deuxième concerne les non-linéarités de l'ensemble du dispositif expérimental, c'est-à-dire les potences, le support des pendules, la table etc. qui tendent à synchroniser les oscillateurs. La synchronisation de systèmes dynamiques est un sujet compliqué ³, et nous déconseillons d'en parler dans la leçon, mais avoir l'explication en tête au cas où ne peut pas nuire :)

4/ Aspect énergétique

Vouloir justifier l'expression de l'énergie potentielle de torsion est une intention louable, mais malheureusement la démonstration proposée est fausse. Pour la faire proprement, il faut considérer le fil de torsion fixé à une de ses extrémités et tordu d'un angle θ à l'autre, et calculer le travail à fournir pour augmenter l'angle de torsion de $d\theta$. L'expression se transpose au cas considéré avec $\theta = \theta_2 - \theta_1$.

Il est là encore très important de bien opposer les échanges d'énergie entre pendules et la conservation de l'énergie de chaque mode propre, qui, rappelons-le, ne dépend **que** des conditions initiales. Par conséquent, parler du mode symétrique comme de « l'état de plus basse énergie » n'a aucun sens. C'est certes l'état favorisé aux temps longs, mais le vocabulaire (quantique) « de plus basse énergie » n'a pas lieu d'être dans ce contexte.

^{3.} Lire par exemple l'article Synchronization de Pikovsky et Rosenblum: http://www.scholarpedia.org/article/Synchronization ou leur livre avec Kurths: Synchronization. A Universal Concept in Nonlinear Sciences (2001).

II - La résonance magnétique

L'exemple choisi ici ne permet pas de traiter le sujet. En effet, il se place d'emblée dans un système forcé, et manque toute la physique du régime libre ... alors que le paragraphe I n'a lui jamais abordé le forçage.

Il ne semble pas vraiment possible d'adapter l'exemple : la seule façon consisterait à prendre en compte un champ complètement statique,

$$\vec{B} = B_0 \vec{e}_z + B_1 \vec{e}_x \,, \tag{1}$$

mais choisir l'axe z comme axe de quantification serait alors particulièrement maladroit.

Nous avons donc décidé de ne pas écrire de commentaires détaillés sur cette partie, mais de les remplacer par des conseils sur ce qui nous semble une bonne façon de traiter la partie quantique de la leçon.

Il s'agit d'abord de savoir quel exemple choisir. Nous vous conseillons de traiter la molécule d'ammoniac, mais d'autres exemples sont possibles. Parmi ces exemples : l'ion H_2^+ , mais il n'est pas satisfaisant de ne pas traiter sa stabilité ... mais le faire est hors sujet; la molécule d'éthylène, mais il faut justifier l'oubli des électrons σ ; un atome à deux niveaux en interaction avec un champ, mais vous devez alors lire les 470 pages du livre de Cohen–Tannoudji, Dupont–Roc et Grynberg pour pouvoir répondre aux questions du jury; une particule dans un double puits de potentiel, mais il faut le présenter avec un exemple concret ; etc.

Dans l'exemple de la molécule d'ammoniac, la rotation de la molécule autour de son axe est importante dans le raisonnement : si ça n'était pas le cas, on passerait d'un état à l'autre par une simple rotation (lire Feynman ou Le Bellac).

De manière générale, la modélisation comporte deux difficultés : isoler deux niveaux du reste du spectre du hamiltonien, et justifier le terme de couplage. Pour pouvoir se limiter à deux niveaux, il suffit que les énergies mises en jeu soient très grandes ou très petites devant celles des phénomènes négligés. Ainsi, on chasse du spectre les phénomènes avant de grandes échelles d'énergie (qui ne correspondent pas à des niveaux peuplés) et on applatit ceux qui ont de très petites énergies (et on factorise ces degrés de liberté, en supposant qu'ils sont les mêmes dans les deux états qui nous intéressent). Le terme de couplage peut souvent être vu comme un effet tunnel (ça n'est pas le cas pour le spin 1/2 de l'exemple choisi ni pour un atome à deux niveaux), auquel cas on assimile le système à deux niveaux à un double puits de potentiel, avec une barrière très haute mais assez fine pour que l'effet tunnel entre les deux puits ne soit pas négligeable. Dans le cas de la molécule d'ammoniac, on peut se dire

que les atome d'hydrogène constituent un double puits effectif pour l'atome d'azote, et appliquer les résultats du calcul du double puits, qui donne un terme de couplage de l'ordre de

$$A \simeq E_0 e^{-K\Delta}, \qquad (2)$$

où E_0 est la hauteur du puits, Δ la largeur de la barrière, et $K = \sqrt{2mE_0}/\hbar$ (cf. Basdevant-Dalibard, qui donne d'ailleurs des ordres de grandeur pour NH₃). Selon la manière dont vous voulez orienter votre leçon, vous pouvez choisir de détailler le calcul de ce terme de couplage, ou simplement expliquer son origine physique, en utilisant des résultats admis en prérequis.

Dans le cas du système quantique à deux niveaux, on ne considère plus des variables continues qui oscillent (comme l'angle d'un pendule), mais des états dans un espace de Hilbert. Ce qui justifie l'analogie avec les oscillateurs classiques est l'évolution temporelle libre de ces états, donnée par l'opérateur d'évolution

$$\hat{U}(t) = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}\hat{H}t}{\hbar}\right) \tag{3}$$

où \hat{H} est l'opérateur hamiltonien, que nous avons supposé ne pas dépendre du temps. Ainsi, si les états $|1\rangle$ et $|2\rangle$ d'énergies $\hbar\omega_1$ et $\hbar\omega_2$ sont des états propres du hamiltonien ⁴, ils évoluent selon

$$\hat{U}(t)|1\rangle = e^{-i\omega_1 t}|1\rangle$$
 et $\hat{U}(t)|2\rangle = e^{-i\omega_2 t}|2\rangle$. (4)

Les oscillateurs que l'on étudie sont donc ici constitués par la phase des états quantiques.

Quand les états $|1\rangle$ et $|2\rangle$ ne sont plus des états propres du hamiltonien (par exemple si on les couple), il faut le diagonaliser de manière à déterminer quels sont les états qui évoluent « naturellement » sous l'action de l'opérateur d'évolution, c'est-à-dire en ne subissant qu'un déphasage global. Ces états propres du hamiltonien sont l'analogue des modes propres classiques. Comme eux, ils évoluent de manière indépendante. De la même manière que les modes normaux de vibration sont orthogonaux au sens du produit scalaire adéquat, les états propres du hamiltonien sont (ou peuvent être choisis) orthogonaux, en vertu du théorème spectral. Ici, l'énergie d'un état est la valeur propre du hamiltonien correspondant à cet état, et il n'y a pas de sens à se demander si elle est conservée.

Dans le cas quantique, l'importance de chaque état propre est quantifiée par sa probabilité. Faisant intervenir des grandeurs quadratiques, c'est la probabilité quantique est l'analogue formel de l'énergie classique. Elle est conservée 5 , encore une fois grâce à l'orthogonalité des états propres. Par contre, de même que de l'énergie est échangée entre les deux pendules dans le cas classique, de la probabilité est échangée entre les états $|1\rangle$ et $|2\rangle$ du hamiltonien, quand ils ne sont plus états propres. On

$$\hat{H}' = \hbar\omega |1\rangle \langle 1| + \hbar\omega |2\rangle \langle 2| + A(|1\rangle \langle 2| + |2\rangle \langle 1|) \tag{5}$$

qu'on peut écrire

$$\hat{H}' = \hbar \omega_{\rm s} |{\rm s}\rangle \langle {\rm s}| + \hbar \omega_{\rm a} |{\rm a}\rangle \langle {\rm a}| \tag{6}$$

avec $|s\rangle = (|1\rangle + |2\rangle)/\sqrt{2}$ et $|a\rangle = (|1\rangle - |2\rangle)/\sqrt{2}$, $\omega_s = \omega + A/\hbar$ et $\omega_a = \omega - A/\hbar$, alors si on part de l'état initial quelconque $|\psi\rangle = \sigma |s\rangle + \alpha |a\rangle$, les probabilités $P_s = \langle s|\psi\rangle = \sigma$ et $P_a = \langle a|\psi\rangle = \alpha$ sont bien conservées.

^{4.} Le hamiltonien correspondant peut alors s'écrire sous la forme $\hat{H}=\hbar\omega_1\ket{1}\bra{1}+\hbar\omega_2\ket{2}\bra{2}$ pour un système à deux niveaux.

^{5.} Considérons un hamiltonien avec interaction entre les états $|1\rangle$ et $|2\rangle,$ par exemple

parle de battements dans le cas classiques et d'oscillations de Rabi dans le cas quantique, mais le phénomène est le même : le système passe d'un côté à un autre (d'un pendule à l'autre, de $|1\rangle$ à $|2\rangle$). Pour véritablement se rendre compte de l'analogie entre les deux situations, il faut comparer l'enveloppe des battements avec la courbe des oscillations de Rabi.

Même si vous n'en parlez pas pendant la leçon, il convient d'avoir en mémoire une différence fondamentale entre les deux situations : dans le cas quantique, il est possible de projeter les états sur une base donnée (par une mesure). Cette opération (qui ne conserve pas les probabilités) n'a pas d'équivalent classique.

Dans votre discours, il est important de faire ressortir les analogies entre le cas classique et le cas quantique sans en oublier les différences. D'un point de vue historique, cette analogie est importante, car l'analyse en mode normaux (ou coordonnées normales, en mécanique analytique) a ouvert la voie à la mécanique quantique.

Enfin, il est toujours utile de motiver ce qu'on fait. L'étude du système à deux niveaux permet par exemple d'expliquer le Maser à ammoniac. Si vous savez expliquer son principe, vous pouvez le citer. On peut trouver des illustrations intéressantes de ce genre pour les autres exemples.

Questions

Les questions servent d'abord à éclaircir les points peu clairs de la leçon, puis ensuite à tester vos connaissances plus largement. Voilà quelques notions sur des points qui pourraient être discutés lors des questions.

Le système différentiel obtenu dans le cadre classique est d'ordre 2, celui du cadre quantique d'ordre 1. Il n'y a pas de contradiction, puisqu'un système d'ordre 2 peut sans peine être écrit dans le cas quantique : il suffit de dériver le système d'ordre 1. Écrire un système d'ordre 1 pour le cas classique est plus subtil, et nécessite d'introduire une réprésentation complexe pour laquelle il faut déjà avoir résolu le problème des battements, cf. BUP 574, ou d'utiliser les équations canoniques de Hamilton.

Si vous décidez de ne pas le présenter dans la leçon (ce qui est raisonnable pour la gestion du temps), le forçage d'un système d'oscillateurs couplés classiques peut faire l'objet de question. Le point à retenir est qu'un tel système entre en résonance lorsque la fréquence de forçage correspond à une de ses fréquences propres. Il arrive aussi sur certains systèmes (ressorts) qu'on rencontre des *anti*-résonances, pour lesquelles l'amplitude des oscillations est nulle alors même que le système est forcé.

Dans le modèle de double puits, l'état antisymétrique est d'énergie plus élevée que l'état symétrique. Cela peut s'interpréter en remarquant que la fonction d'onde antisymétrique possède un nœud, entraînant un confinement plus important pour la particule, et donc une énergie (cinétique) plus élevée.

L'état fondamental (de plus basse énergie) du double puits a une énergie plus basse que l'état fondamental d'un puits simple. Ce résultat très général peut s'interpréter par un élargissement effectif du puits par effet tunnel. Le couplage tunnel tend à stabiliser les sytèmes quantiques.

Remarque de vocabulaire : un système quantique « à deux états » possède en fait *une infinité* d'états, mais ces derniers ne se décomposent que sur deux états de base.

L'écart en énergie entre les niveaux quantiques se mesure rarement (jamais) en laissant un système placé dans son état de plus haute énergie relaxer librement en émettant un photon dont on mesure la fréquence. Par exemple, le temps de demi-vie de l'état antisymétrique de l'ammoniac est de l'ordre d'un mois. Au contraire, on utilise un forçage du système, par exemple par une onde électromagnétique, et on mesure la fréquence de résonance.

Idées de bibliographie

- ▷ BUP 574 : Systèmes à deux états, M. Gerl, qui porte sur le sujet de la leçon : cet article contient beaucoup d'informations utiles dont toutes ne sont pas pertinentes pour cette leçon ;
- ▷ *Mécanique*, Faroux et Renault;
- ▷ Cours de physique de Berkeley, Ondes, F. S. Crawford : la partie sur les oscillateurs est bien faite (au contraire de la partie sur les ondes, qui n'apporte pas grand chose);
- ▷ Mécanique quantique, Dalibard et Basdevant, qui traitent le double puits, la molécule d'ammoniac, et le lien entre les deux;
- ▷ Mécanique quantique, Le Bellac, qui donne une perspective moderne sur la mécanique quantique : ce livre est utile pour comprendre, mais il ne faut pas le suivre aveuglément pour préparer votre leçon car il va loin;

Complément sur la FFT

Vous devez absolument savoir expliquer comment les paramètres d'acquisition influent sur une FFT:

- \triangleright le temps total d'acquisition T donne l'espacement fréquentiel entre les pics de la FFT $\Delta f = 1/T$;
- ▷ la période d'échantillonnage T_e donne la bande totale de fréquence accessible à la FFT $[0, 1/T_e]$;
- \triangleright l'amortissement sur un temps typique τ élargit les transformées de Fourier sur une bande de fréquence $1/\tau$.

Par conséquent, si l'amortissement est important comme c'était le cas sur les acquisitions, l'élargissement fréquentiel qu'il entraı̂ne se verra par de nombreux pics de hauteur non négligeable dans la FFT, puisque $1/\tau \gg 1/T$.

S'ajoute à cela l'influence de la fenêtre d'acquisition, mais elle n'élargit les transformées de Fourier que sur des échelles de l'ordre de 1/T, ce qui la rend en général masquée par la dissipation. Rappelez-vous en effet que la transformée de Fourier d'un produit est la convolution des transformées de Fourier. Un sinus multiplié par un amortissement exponentiel et par une fenêtre carrée correspond donc à une distribution de Dirac convoluée avec une lorentzienne et avec un sinus cardinal. Si un de ces pics est nettement plus large que les autres (ici, c'est le

cas : la lorentzienne est beaucoup plus large), c'est essentiellement lui qu'on va observer.

Autre discussion que vous devez savoir mener : on veut mesurer avec précision le temps caractéristique τ_0 d'un phénomène. Comment choisir les paramètres de la FFT ? Réponse : l'échantillonnage doit être tel que $1/T_e\gg 1/\tau_0$, et pour avoir une précision suffisante il faut prendre $1/T\ll 1/\tau_0$.

Conclusion

La leçon qui a été présentée ne peut pas être reprise directement, mais nécessite un travail conséquent. Les leçons des années précédentes (sessions 2013 et 2012, disponibles sur le portail des études) sont assez bien construites : vous pouvez vous en inspirer pour construire votre leçon.

Si vous avez d'autres questions, nous restons à votre disposition par mail, en TP, ou dans de futures séances de correction.